

Réduction dimensionnelle de type PGD pour le calcul numérique d'agrégats polycristallin soumis à des chargements cycliques

M.A. Nasri^a, C. Robert^a, F. Morel^a, S. EL Arem^a, A. Ammar^a

a. Arts et Métiers Paristech, campus d'Angers, LAMPA, 2 Boulevard du Ronceray, 49100 Angers, France
Mohamed-Aziz.Nasri@ensam.eu

Résumé :

Les modélisations numériques des matériaux à l'échelle de la microstructure se sont fortement développées au cours des deux dernières décennies. Malheureusement, les méthodes de résolution classiques ne permettent pas de simuler les agrégats polycristallins au-delà de quelques dizaines de cycles à cause du temps de calcul prohibitif. Ce travail présente le développement d'une méthode numérique pour la résolution par la méthode des éléments finis d'agrégats polycristallins soumis à un chargement cyclique. La première idée est de maintenir la matrice de rigidité constante. La deuxième proposition est d'utiliser une méthode de réduction dimensionnelle en espace/temps. Les résultats montrent un gain de temps relativement important tout en gardant une très bonne précision

Abstract :

The numerical modeling of materials at the microstructural scale has been greatly developed over the last two decades. Unfortunately, conventional resolution methods cannot simulate polycrystalline aggregates beyond several tens of cycles because of the prohibitive calculation times. This work presents the development of a numerical method for the resolution of the finite element modelling of polycrystalline aggregates subjected to cyclic mechanical loading. The method is based on two concepts. The first is to maintain a constant stiffness matrix. The second concerns the use of a time/space model reduction method. The results show a significant time savings while maintaining good precision

Mots clefs : PGD ; éléments finis ; plasticité ; agrégats polycristallins

1 Introduction

La prise en compte de la naissance et de la propagation des fissures dans le régime de fatigue à grand nombre de cycles ($10^6 - 10^7$ cycles) s'est heurtée aux difficultés inhérentes à l'échelle où les mécanismes moteurs prennent place (échelle de la microstructure). Plus exactement, après amorçage, les microfissures passent une fraction importante de la durée de vie totale à se propager à travers trois ou

quatre grains avant de bifurquer vers un autre mode de propagation. A cette échelle, la plasticité locale, les hétérogénéités microstructurales ainsi que les orientations cristallines jouent un rôle primordial sur l'évolution du dommage. Pour connaître l'historique des variables locales d'un point de vue numérique, il ne suffit pas d'effectuer un simple calcul monotone, mais il faut simuler toute l'histoire du chargement jusqu'au cycle stabilisé. La détermination de cet état limite avec les méthodes classiques incrémentales nécessite un nombre important d'incrément. De plus, pour des problèmes à grand nombre de degrés de liberté, la résolution du système linéaire est très coûteuse en temps CPU. Ainsi la simulation sur plusieurs milliers de cycles d'une structure modélisée par un nombre élevé de degrés de liberté n'est pas réalisable dans des délais de temps raisonnable avec une méthode classique. Afin de déterminer numériquement la réponse stabilisée, il est donc nécessaire de développer des méthodes accélérées pour la résolution du problème par la méthode des éléments finis. Ce travail vise à explorer l'apport des méthodes de réduction de modèle pour le traitement des problèmes cycliques. Pour cela, une implémentation de la PGD pour le calcul en plasticité d'agrégats polycristallins est développée.

2 Méthodes numériques utilisées

Soit une structure quelconque sollicitée sous un chargement qui évolue sur un intervalle de temps. L'objectif est de déterminer la réponse de la structure en chaque point de la l'espace et sur l'intervalle étudié. Ces réponses sont calculées par la résolution des équations d'équilibre, de compatibilité et de comportement. Les conditions aux limites et les conditions initiales doivent également être prises en compte. Ces équations sont ensuite discrétisées en temps et en espace pour la résolution numérique, et dans notre cas, par la méthode des éléments finis. La résolution du problème spatio-temporel est effectuée généralement par la méthode incrémentale qui se base sur le principe de linéarisation de Newton-Raphson. C'est la technique de résolution la plus commune dans les codes de calcul. Pour assurer une bonne convergence, l'intervalle d'étude est discrétisé en incréments de temps (ou de chargement) relativement petits. Les équations d'équilibres sont vérifiées à tous les instants de l'intervalle d'étude discrétisé. La méthode des éléments finis permet de calculer l'incrément de déplacement ΔU par la résolution du système matriciel suivant :

$$K_t \Delta U = \Delta F_{ext} \quad (1)$$

Avec K_t la matrice de rigidité tangente et ΔF_{ext} l'incrément des forces extérieures. Ensuite, à partir du champ de déplacement trouvé dans l'équation (1), les champs de contraintes, de déformations plastiques ainsi que les variables internes sont calculés par la résolution de la loi de comportement. Ce schéma est itératif et répété jusqu'à la convergence de la solution pour chaque incrément ($\Delta F_{ext} - \Delta F_{int} = 0$).

Cette méthode est généralement prise comme référence et est très couramment utilisée dans les codes de calcul commerciaux et académiques. Cependant, la matrice de rigidité tangente est recalculée à chaque itération et engendre un coût de calcul important pour un nombre de degrés de liberté élevé. De plus, ce temps de calcul est proportionnel à la discrétisation temporelle et donc au nombre de cycles simulés.

Afin de réduire le temps de calcul, deux idées sont utilisées. Tout d'abord garder la matrice de rigidité constante pour ne faire qu'une factorisation. Ensuite, utiliser une méthode de réduction de modèle pour découpler les dimensions d'espace et de temps.

Pour ce qui est de garder la matrice de rigidité constante, les travaux de [1, 2] sont repris. Il s'agit de réécrire l'équilibre (équation 1) sous la forme suivante :

$$K\Delta U = \Delta F_{ext} + \Delta Q \quad (2)$$

avec :

$$\Delta Q = \int_{\Omega} B^T C \Delta \varepsilon^p d\Omega \quad (3)$$

et :

$$K = \int_{\Omega} B^T C B d\Omega \quad (4)$$

B est une matrice qui contient les dérivées des fonctions de formes des éléments finis, et C le tenseur d'élasticité du matériau.

La PGD [3] a été choisie comme méthode de réduction de modèle. Cette méthode, qui s'appuie sur approximation radiale [4], a montré son efficacité pour la résolution de problèmes à grand nombre de degrés de liberté [5, 6]. Le principe général est de chercher la solution définie sur l'ensemble du domaine espace/temps sous la forme d'une somme de produits de fonctions de chaque variable, le vecteur des incréments de déplacement s'écrit alors :

$$\Delta U \approx \Delta U_m = \sum_{i=1}^m \alpha^i \Delta U_x^i \otimes \Delta U_t^i \quad (5)$$

ΔU_x est un vecteur qui correspond à la dimension d'espace (nombre de degrés de liberté) et ΔU_t correspond à dimension temporelle (nombre de pas de temps). α est un facteur de pondération. m est le nombre de modes nécessaires à approximer la solution. La matrice de rigidité, constante, est décomposée avec 1 seul mode, et le second membre, grâce à une SVD tronquée [7]. L'équilibre s'écrit alors :

$$(K_x \otimes K_t) \sum_{i=1}^m \alpha^i \Delta U_x^i \otimes \Delta U_t^i = \sum_{i=1}^n \Delta F_x^i \otimes \Delta F_t^i \quad (6)$$

La résolution se fait en 3 étapes :

- Enrichissement : l'ordre m est calculé à partir de la connaissance de l'ordre $m - 1$
- Projection : les coefficients de pondération sont calculés grâce à des projections successives sur chaque mode
- Estimation de la convergence : la convergence est calculée à l'ordre m par la vérification de l'égalité de l'équation 6

La résolution PGD est réalisée successivement jusqu'à convergence du champ de déformation plastique.

La méthode PGD a été implémentée dans un code de calcul développé au Laboratoire Angevin de Mécanique, Procédés et innovAtion [8].

3 Modélisation numérique

Dans ce travail, les simulations sont réalisées sur un agrégat polycristallin. La géométrie des grains est cubique et l'agrégat est composé de 512 grains. La discrétisation est faite avec des éléments finis hexaédriques à interpolation linéaire. Plusieurs densités de maillage sont réalisées, allant de 1 élément à 512 éléments par grains.

La loi de comportement cristalline utilisée dans ce travail a été introduite par Méric et Cailletaud [9]. Elle est couramment utilisée pour la simulation numérique d'agrégats polycristallins [10, 11, 12]. Les

relations constitutives sont définies par les équations (7-12). Le modèle est utilisé dans le cadre des petites perturbations, avec un comportement élastique orthotrope (paramètres C_{11} , C_{22} et C_{12}). γ^s représente le glissement plastique sur le système s , et ν^s le glissement plastique cumulé sur le système s . L'écrouissage isotrope est défini sur chaque système de glissement par la variable r^s , et l'écrouissage cinématique par la variable x^s . c et d sont des paramètres de la loi de comportement. Le tenseur d'orientation \mathbf{m}^s , qui est calculé sur chaque système de glissement s par le produit tensoriel de la normale au plan de glissement \mathbf{n}^s et la direction de glissement \mathbf{l}^s , est utilisé pour le calcul de la cisssion résolue τ^s et le tenseur du taux de déformation plastique, $\dot{\epsilon}_p$. Les deux paramètres matériau, K et n , représentent la sensibilité à la vitesse de déformation. Enfin, les paramètres r_0 , Q et b (ainsi que les composantes h_{rs} de la matrice d'interaction) sont utilisés pour la modélisation de l'écrouissage isotrope.

$$\dot{\gamma}^s = \left(\frac{\|\tau^s - x^s\| - r^s}{K} \right)^n \text{sign}(\tau^s) = \dot{\nu}^s \text{sign}(\tau^s) \quad (7)$$

$$x^s = c\alpha^s \text{ with } \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\nu^s\alpha^s \quad (8)$$

$$r^s = r_0 + Q \sum_r h^{rs} (1 - \exp(-b\nu^r)) \quad (9)$$

$$\mathbf{m}^s = (\mathbf{n}^s \otimes \mathbf{l}^s + \mathbf{l}^s \otimes \mathbf{n}^s) / 2 \quad (10)$$

$$\tau^s = \mathbf{m}^s : \boldsymbol{\sigma} \quad (11)$$

$$\dot{\epsilon}^{pl} = \sum_s \dot{\gamma}^s \mathbf{m}^s \quad (12)$$

Le matériau choisi est un acier inoxydable 316L. Les paramètres matériau, identifiés par [13] sont reportés dans la table 1. Le jeu d'orientation est choisi de manière à avoir une texture isotrope.

K [MPa.s ^{$\frac{1}{n}$}]		n [-]	r_0 [MPa]		Q [MPa]	b [-]	c [MPa]	d [-]
12		11	40		10	3	40×10^3	1500
h_0 [-]	h_1 [-]	h_2 [-]	h_3 [-]	h_4 [-]	h_5 [-]	C_{11} [GPa]	C_{22} [GPa]	C_{12} [GPa]
1	1	0.6	12.3	1.6	1.8	197	125	122

TABLE 1: Paramètres matériau utilisés

Les agrégats sont soumis à une déformation macroscopique purement alternée de 0.1% sur 10 cycles.

4 Résultats

Tout d'abord, afin de mieux appréhender les résultats obtenus avec la PGD, la figure 1 montre la convergence, au niveau de la contrainte macroscopique, pour un chargement monotone. La première itération donne une réponse proche du linéaire, ce qui est logique étant donné que le vecteur ΔQ n'est pas connu a priori (et donc nul pour la première itération). Les itérations suivantes tendent à se rapprocher de la courbe convergée et les derniers incréments de temps sont toujours les plus éloignés de la solution du fait du calcul incrémental de la loi de comportement.

Les résultats sont comparés au niveau des valeurs macroscopiques (moyennes dans l'agrégat) et méso-scopiques (moyennes dans les grains). La figure 2 montre l'évolution de la contrainte macroscopique

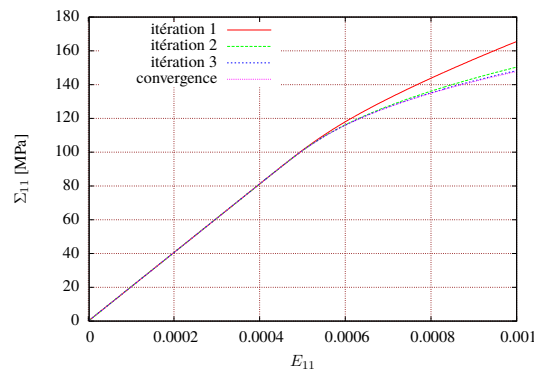


FIGURE 1: Convergence de la méthode PGD

en fonction de la déformation macroscopique pour le dixième cycle tandis que la figure 3 présente les résultats à la fin du dernier cycle en terme de contrainte et déformation mésoscopique pour chacun des 512 grains qui compose l'agrégat. Ces deux figures montrent bien que la méthode développée permet d'obtenir des résultats très proches de la méthode incrémentale. Il est cependant possible de constater que les écarts sont les plus importants au niveau de la déformation mésoscopique mais reste tout à fait acceptable (écart relatif maximum inférieur à 0.1%). Ces différences peuvent être atténuées en diminuant la tolérance, mais dans ce cas, le temps de calcul augmente significativement.

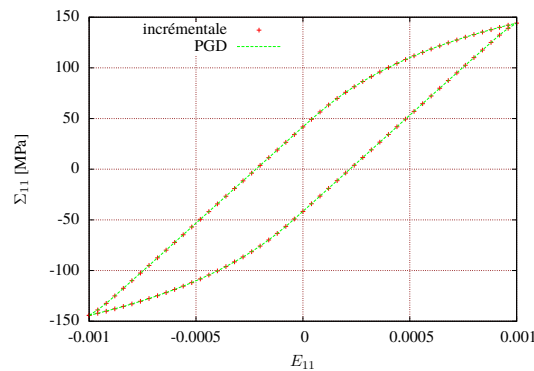


FIGURE 2: Courbes contrainte-déformation macroscopiques obtenue avec la méthode incrémentale et la méthode PGD

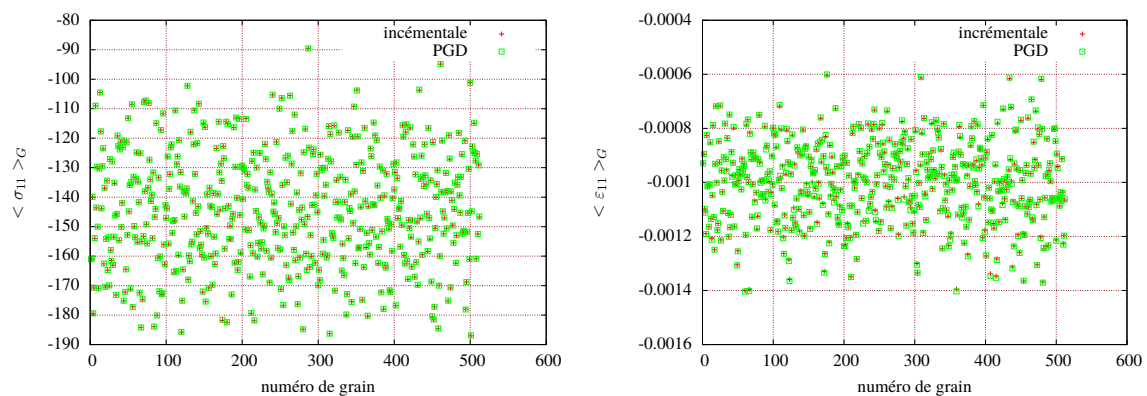


FIGURE 3: Comparaison des valeurs moyennes dans les grains obtenue avec la méthode incrémentale et la méthode PGD

La figure 4 montre le nombre d'itérations nécessaire à la PGD, pour chaque cycle, pour obtenir la convergence. Les premiers cycles sont les plus coûteux, car le comportement évolue de manière conséquente d'un cycle à l'autre. A partir d'un certain nombre de cycle (dans de cas 4), seulement 4 itérations suffisent pour obtenir la convergence. Pour ce qui est du temps de calcul par cycle (figure 4a), il est logiquement proportionnel au nombre d'incrément. Cependant le temps CPU du deuxième cycle augmente par rapport au premier malgré une diminution d'itération. Cela est dû à un nombre d'enrichissements plus important.

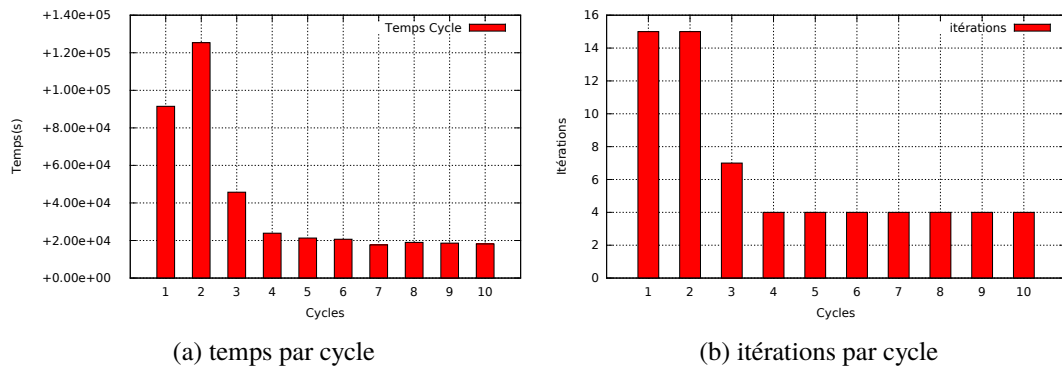


FIGURE 4: Temps et nombre d'itérations par cycle pour la méthode PGD avec 32^3 éléments et $[0, T] = 1000inc$

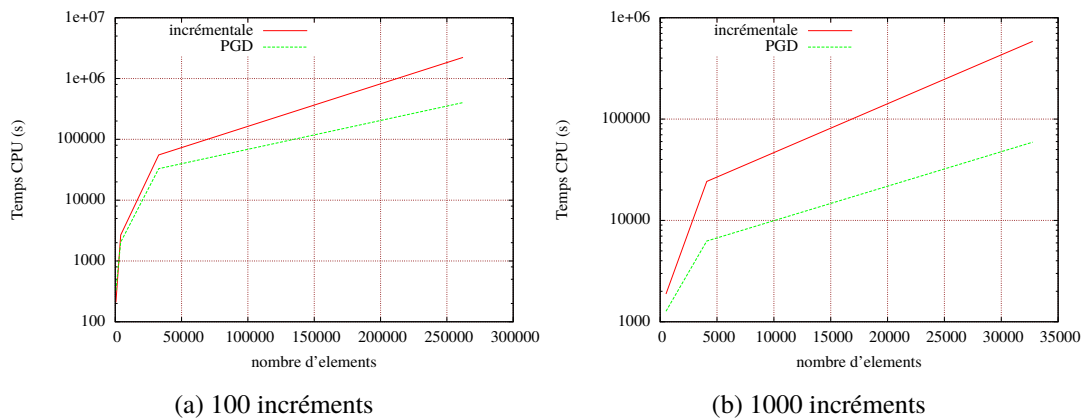


FIGURE 5: Temps CPU total obtenue avec la méthode incrémentale et la méthode PGD en fonction du nombre d'éléments

La figure 5 présente le temps CPU obtenu pour la méthode incrémentale et pour la méthode PGD en fonction du nombre d'éléments : 8^3 , 16^3 , 32^3 , 64^3 . Deux discrétisations temporelles sont utilisées : 100 et 1000 incréments. La première remarque est que le temps CPU est moins important avec le calcul PGD que le calcul incrémental. Augmenter le nombre d'éléments (et donc intrinsèquement le nombre de degrés de liberté) permet un gain de temps plus important. Cependant le gain de temps est plus significatif en augmentant la discrétisation temporelle. A titre d'exemple, le rapport de temps de calcul pour 32^3 éléments et une discrétisation de 1000 incréments montrent que la PGD est 10 fois plus rapide que le calcul incrémental et 6 fois plus rapide dans le cas de 64^3 éléments et avec une discrétisation de 100 incréments.

5 Conclusion

Une implémentation de la PGD pour le calcul visco-élasto-plastique d'agrégat polycristallin est proposée. Les résultats sont comparés avec la méthode incrémentale classiquement utilisée dans les codes de calculs commerciaux (ABAQUS, ANSYS, ...). Les analyses montrent une très bonne adéquation entre les deux méthodes de résolution avec un gain de temps pour la PGD conséquent (allant jusqu'à un facteur 10 pour les cas traités). Il est notable qu'une contrepartie de ce gain de temps et une utilisation de mémoire plus importante. Toutefois, l'idée de mettre les non-linéarités dans le second membre pour garder la matrice de rigidité constante peut également être faite pour la méthode incrémentale. Ceci pourrait permettre un gain de temps encore plus conséquent.

Références

- [1] K. V. Spiliopoulos, K. D. Panagiotou, A direct method to predict cyclic steady states of elastoplastic structures, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 223-224 (2012) 186–198.
- [2] B. Pommier, Détermination de la réponse asymptotique d'une structure anélastique soumise à un chargement thermomécanique cyclique. Thèse, École Polytechnique, 2003.
- [3] A. Ammar, The proper generalized decomposition : a powerful tool for model reduction, *Int J Mater Form*, 3 (2009) 89–102.
- [4] P. Ladevèze, *Nonlinear computational structural mechanics - New approaches and non-incremental methods of calculation*, Springer Verlag, (1999).
- [5] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings, A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids - Part II : Transient simulation using space-time separated representations, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144 (2007) 98–121.
- [6] F. Chinesta, A. Ammar, E. Cueto, Proper generalized decomposition of multiscale models, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83 (2007) 1114–1132.
- [7] G. Maîtrejean, *Contributions à la modélisation numérique de la théorie cinétique des suspensions*. Thèse, Université Grenoble, 2011.
- [8] C. Robert, C. Mareau, A comparison between different numerical methods for the modeling of polycrystalline materials with an elastic–viscoplastic behavior, *Computational Materials Science*, 103 (2015) 134–144.
- [9] L. Méric, G. Cailletaud, Single crystal modeling for structural calculations. Part 2 : Finite element implementation, *J. of Engng. Mat. Technol*, 113 (1991) 171–182.
- [10] C. Robert, N. Saintier, T. Palin-Luc, F. Morel, Micro-mechanical modelling of high cycle fatigue behaviour of metals under multiaxial loads, *Mechanics of Materials*, 55 (1991) 112–129.
- [11] R. Guerchais, C. Robert, F. Morel, N. Saintier, Micromechanical study of the loading path effect in high cycle fatigue, *International Journal of Fatigue*, 59 (2014) 64–75.
- [12] F. Barbe, S. Forest, G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2 : Results, *Int. J. Plast*, 17 (2001) 537–563.
- [13] Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J-M. Stéphan, G. Cailletaud, Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates, *Computational Materials Science*, 70 (2013) 150–162.